



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"

Comenzamos en breve, a las 1pm CST / 3pm EDT



Electrones en Movimiento: Efecto de los Campos Magnéticos sobre las Moléculas



Los electrones en las moléculas responden a un campo magnético, ordenándose. Se generan corrientes electrónicas cuya forma depende del arreglo geométrico y las características de los enlaces de las moléculas.

Registrarse Gratuitamente

Durante el webinar gratuito el Dr. José Enrique Barquera Lozada del Instituto de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México discutirá porque estas corrientes son cruciales para entender la respuesta magnética y la naturaleza electrónica de los enlaces químicos, en especial en las moléculas aromáticas. Regístrese para descubrir como responden los electrones a un campo magnético y la relación entre la aromaticidad y las corrientes electrónicas.

Lo Que El Público Aprenderá

- Como responden los electrones a un campo magnético
- La relación entre la aromaticidad y las corrientes electrónicas
- La conexión que hay entre estas corrientes y los espectros de resonancia magnética nuclear (RMN)

Ponente y Moderadora



Dr. José Enrique Barquera Lozada
Profesor del Instituto de Química,
Universidad Nacional Autónoma
de México



Dra. Mariana Esquivelzeta Rabell
Coordinador de Proyectos, Colegio
Madrid A.C.

El webinar número 57 patrocinado en español por ACS y SQM

<https://www.acs.org/acs-webinars/library/campos-magneticos-moleculas.html>

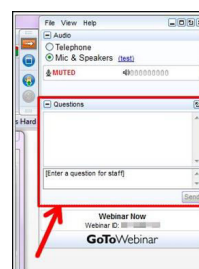
1



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



¿Tiene preguntas para el ponente?



“¿Por qué he sido “silenciado”?”

No se preocupe. Todo el mundo ha sido silenciado, excepto el ponente y la moderadora. Gracias, y disfruten de la presentación.

Escriba y someta sus preguntas durante la presentación

2

¿Está en un grupo hoy viendo el webinar en vivo?

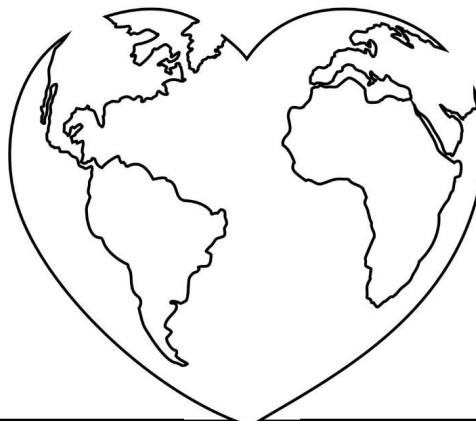


Díganos de dónde son ustedes y cuántas personas están en su grupo!

3

Por el amor a la química venimos de todos partes...

- ✓ Alemania
- ✓ Argentina
- ✓ Bélgica
- ✓ Bolivia
- ✓ Brasil
- ✓ Brunéi
- ✓ Canadá
- ✓ Chile
- ✓ Colombia
- ✓ Costa Rica
- ✓ Ecuador
- ✓ El Salvador
- ✓ España
- ✓ Estados Unidos de América
- ✓ Francia
- ✓ Guatemala
- ✓ Honduras
- ✓ India
- ✓ Italia
- ✓ Japón
- ✓ México
- ✓ Pakistán
- ✓ Panamá
- ✓ Paraguay
- ✓ Perú
- ✓ Portugal
- ✓ Puerto Rico
- ✓ Uruguay
- ✓ Venezuela
- ✓ Viet Nam



Hoy tenemos representantes de **30 países**

4



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



Beneficios de la Afiliación al ACS



Chemical & Engineering News (C&EN)

The preeminent weekly news source



ACS Webinars Archive of Recordings®

ACS Member only access to over 250 edited chemistry themed webinars. www.acswebinars.org



NEW! ACS Career Navigator

Your source for leadership development, professional education, career services, and much more

<http://bit.ly/ACSnewmember>

5



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



Sociedad Química de México



Sociedad Química de México, A.C.
"La química nos une"

Desde sus comienzos de la Sociedad Química de México, se buscaba un emblema sencillo, no demostrar partidismo alguno y significar al gremio, debería representar un símbolo no sólo para los químicos, sino también para ingenieros, farmacéuticos, metalurgistas, en fin que englobe e identifique por igual a los científicos en todas sus áreas de la ciencia química.

www.sqm.org.mx

6



Mantente actualizado sobre la industria de la química
y sus ciencias afines en la región

Suscríbete al Newsletter de CAS Hispanoamérica

Para darte de alta, puedes enviarnos un correo electrónico a
acsihispanoamerica@acs-i.org

¡Hasta pronto!
www.cas.org



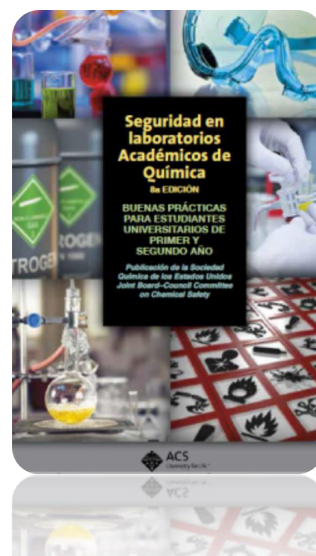
acsihispanoamerica@acs-i.org

7

Recursos del ACS en Español: Educación sobre Seguridad en el Laboratorio



- Seguridad en los laboratorios Académicos de Química para estudiantes Universitarios de Primer y Segundo año.
- Videos sobre RAMP para estudiantes de escuela secundaria (pero también pueden utilizarse para estudiantes universitarios) con subtítulos en español:
 - **Mentalidad de Seguridad**
 - **Hoja de datos de seguridad (SDS)**
 - **¿Cómo vestirse apropiadamente en un laboratorio? Y equipo de protección personal (EPP)**
 - **Preparándonos para emergencias**
 - **RAMP (Para Estudiantes)**
 - **RAMP (Para Educadores)**



<https://www.acs.org/content/acs/en/chemical-safety/resources/spanish-language-safety-resources.html>

8

Electrones en Movimiento: Efecto de los Campos Magnéticos sobre las Moléculas



Dr. José Enrique Barquera Lozada
Investigador Titular A, Departamento de
Fisicoquímica, Instituto de Química
Universidad Nacional Autónoma de México



Dra. Mariana Esquivelzeta Rabell
Coordinador de Proyectos,
Colegio Madrid A.C.

Las imágenes de la presentación están disponibles para el evento de hoy.
<https://www.acs.org/acs-webinars/library/campos-magneticos-moleculas.html>

El Webinar de hoy está auspiciado por la Sociedad Química de México y American Chemical Society.

9

Intro
○○○○○

$J(r)$
○○○○○○○○

Aromaticidad
○○○○○○○

Vorticidad
○○○○○○○○○○○○

Fin
○○○



Electrones en Movimiento: Efectos de los Campos Magnéticos sobre las Moléculas

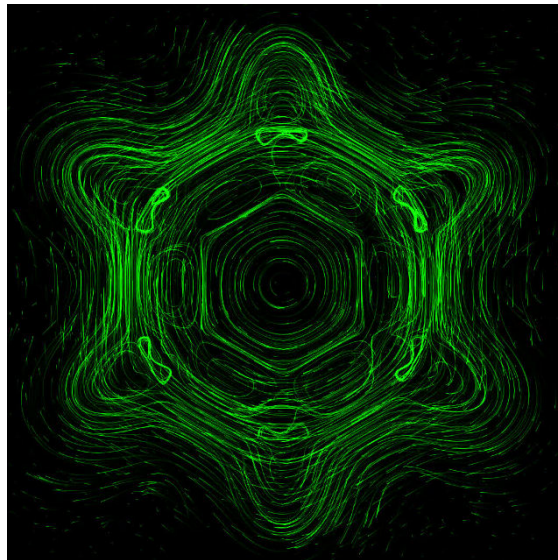
J. E. Barquera-Lozada¹

¹Instituto de Química
UNAM



Extracto

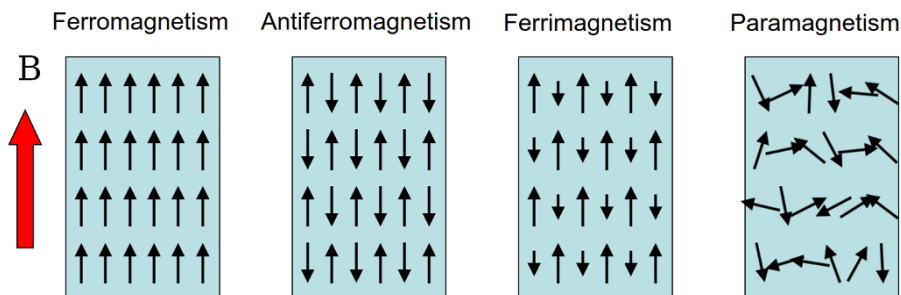
- Respuesta magnética de las moléculas.
- $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ y RMN
- La aromaticidad y $\mathbf{J}(\mathbf{r})$
- La $\nabla \times \mathbf{J}(\mathbf{r})$ da información más fácil de procesar.
- Aromaticidad en sistemas complejos.



Los campos magnéticos producen cambios en las moléculas

En moléculas de capa abierta (electrones sin par con espín contrario)

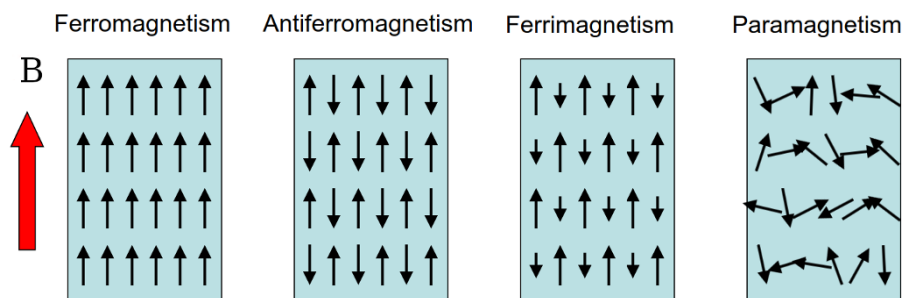
Los spines se ordenan con el campo si es lo suficientemente fuerte



Los campos magnéticos producen cambios en las moléculas

En moléculas de capa abierta (electrones sin par con espín contrario)

Los spines se ordenan con el campo si es lo suficientemente fuerte



¿Solo afectan a moléculas de capa abierta?

¿**B** produce algún otro cambio?

pista: No cura nada

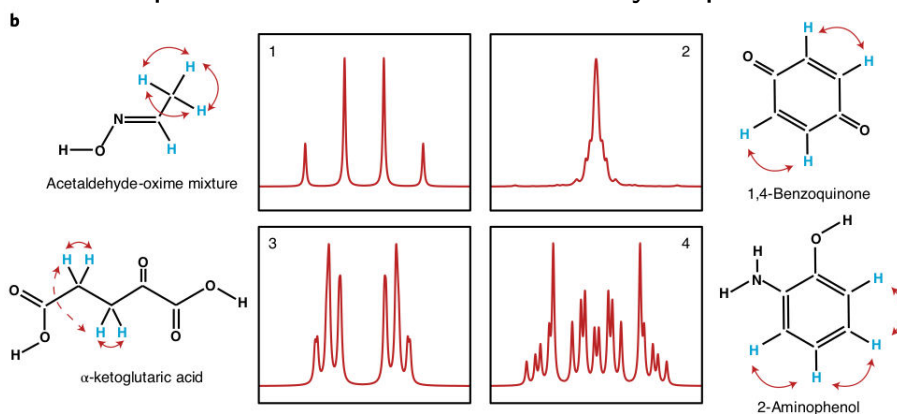


Otro efecto que afecta a todas las moléculas

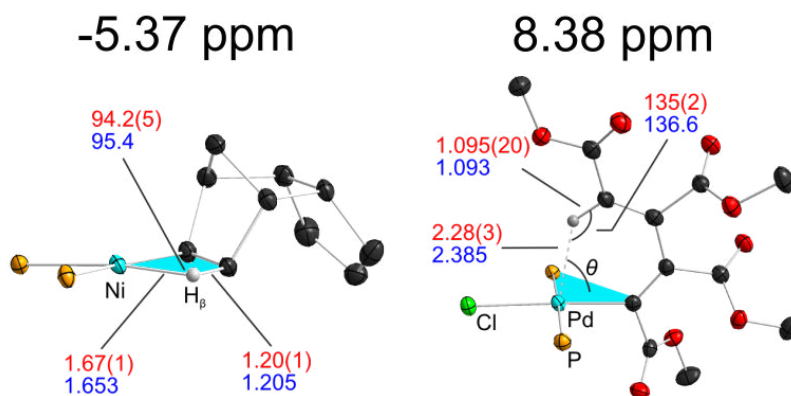
Se puede observar por medio de resonancia magnética nuclear (RMN)

La RMN permite inferir la estructura de las moléculas

El “ambiente químico” determina la forma y la posición de la señal

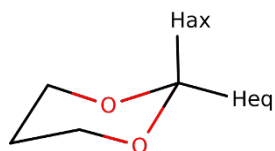


¿Por qué las señales de los H son tan distintas a pesar de ambos estar unidos a un C?

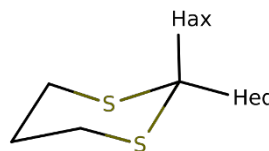


¿Por qué las señales cambia a pesar de estar unidos al mismo C?

$$\delta_{ax} - \delta_{eq} = -0.3$$



$$\delta_{ax} - \delta_{eq} = 0.7$$



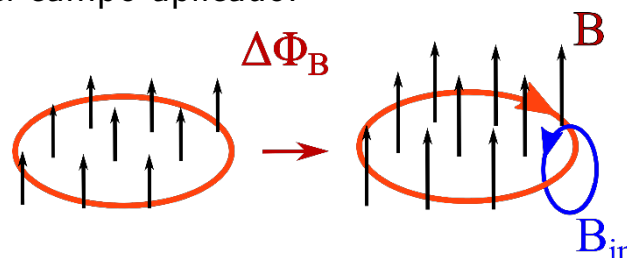
De acuerdo a las Leyes de Faraday y Lenz: ¿Qué sucede al aumentar el campo magnético que interacciona con cargas en una bobina conductora?

- Se produce una corriente con un campo magnético igual a cero.
- No se produce una corriente solo se magnetiza el conductor.
- Se produce una corriente que a su vez produce un campo magnético que magnifica el aumento del campo.
- Se produce una corriente que a su vez produce un campo magnético que se opone al aumento del campo.



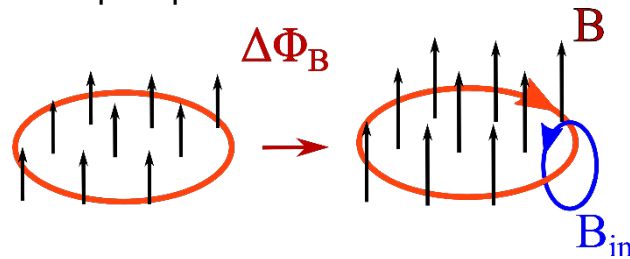
Leyes de Faraday y Lenz

La corriente inducida genera un campo magnético que contrarresta el cambio en el campo aplicado.



Leyes de Faraday y Lenz

La corriente inducida genera un campo magnético que contrarresta el cambio en el campo aplicado.

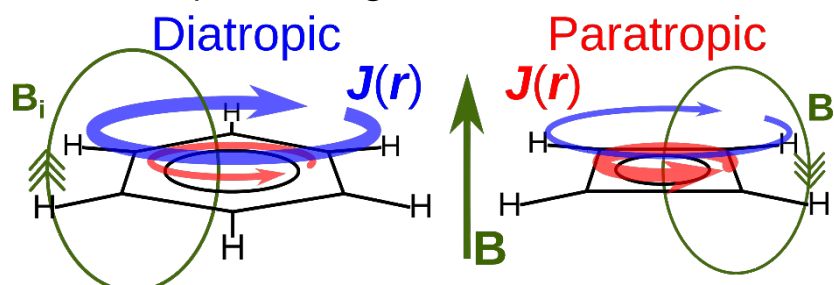


¿Qué sucede a nivel molecular?
¿Los efectos cuánticos cambian algo?



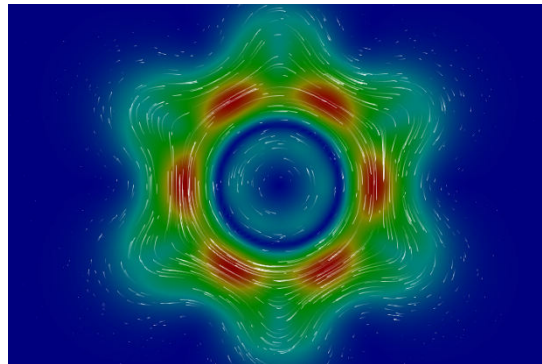
Respuesta magnética a nivel molecular

- La corriente se genera principalmente en dos direcciones: Diatrópico (Clásico) y Paratrópico (Cuántico)
- Tanto la dirección como la magnitud son importantes para entender la respuesta magnética de una molécula.



Respuesta magnética a nivel molecular

- La corriente se genera principalmente en dos direcciones: Diatrópico (Clásico) y Paratrópico (Cuántico)
- Tanto la dirección como la magnitud son importantes para entender la respuesta magnética de una molécula.

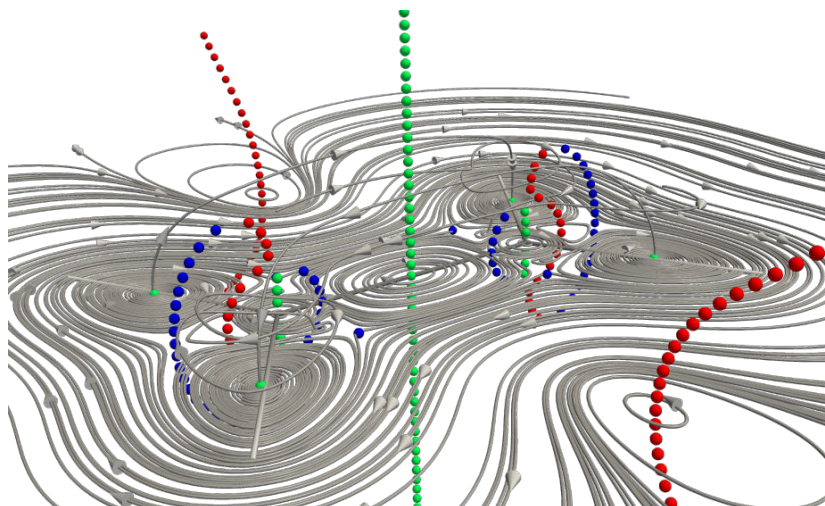


Densidad de corriente inducida $\mathbf{J}(\mathbf{r})$



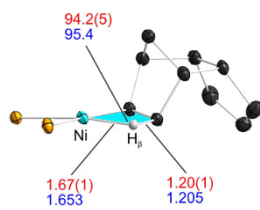
Densidad de corriente inducida $\mathbf{J}(\mathbf{r})$

- Describe el efecto de \mathbf{B} sobre los e^-
- Es pseudo-perpendicular al \mathbf{B} aplicado
- Su topología puede describir la naturaleza electrónica de las moléculas.

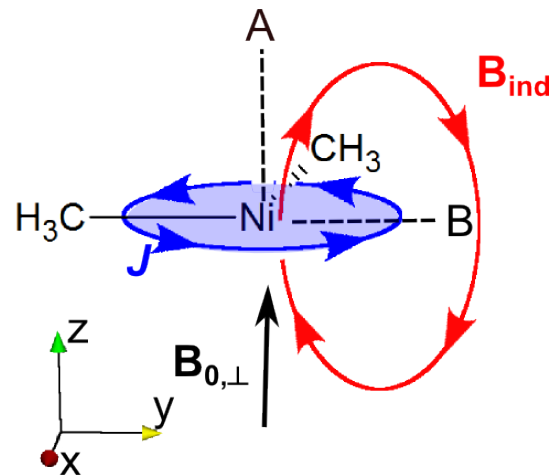
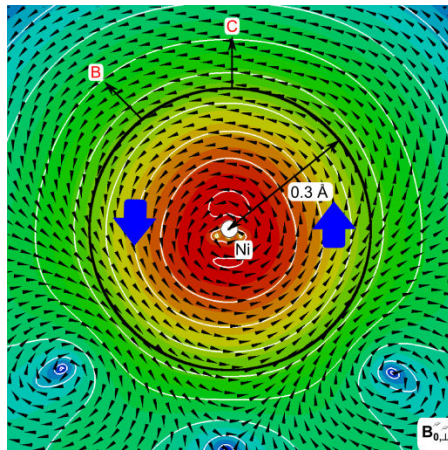
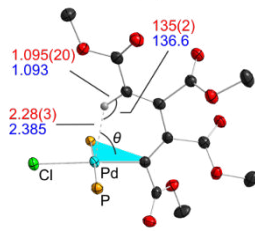


Interacciones agósticas y anagósticas

-5.37 ppm



8.38 ppm

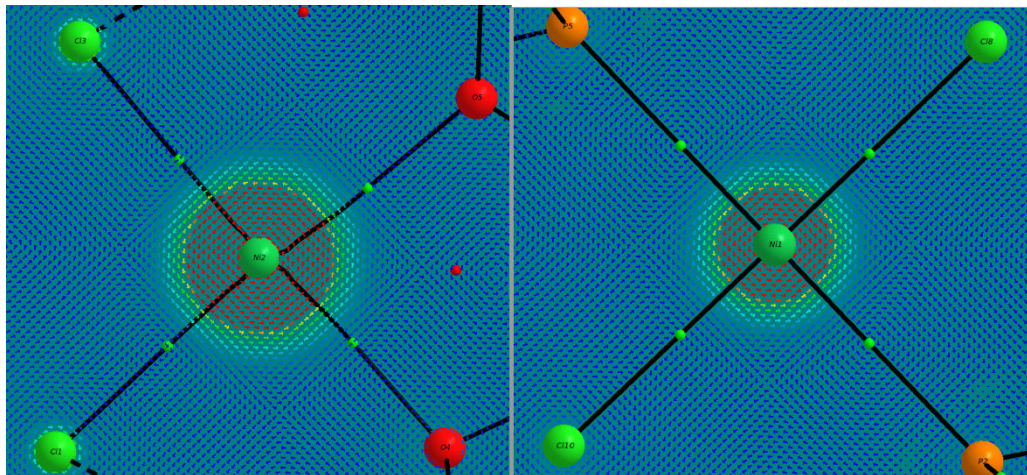


J. E. Barquera-Lozada, et al. *J. Phys. Chem.*, 2013 117, 4304.



Campo ligante y J(r)

- La corriente es mas fuerte para ligantes de campo débil.
- La corriente es mas débil alrededor del metal al bajar en la tabla periódica

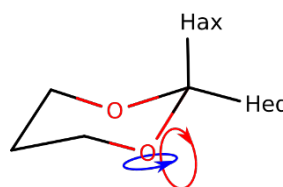


Efecto Perlin

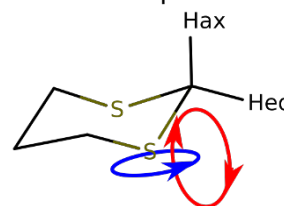
Table 4. Chemical shielding differences between axial and equatorial anomeric hydrogen atoms and the differences of intra and inter contributions. (The main contribution is shown in bold)

#	$\Delta\delta(\text{H})$	$-\Delta\sigma(\text{H, intra})$	$-\Delta\sigma(\text{H, inter})$	Effect
1	-0.428	- 0.270	-0.158	Normal
2	-0.088	- 0.187	0.100	Normal
3	-0.081	- 0.231	0.150	Normal
4	-0.154	- 0.147	-0.006	Normal
5	-0.087	- 0.238	0.151	Normal
6	-0.207	- 0.265	0.059	Normal
7	-0.181	- 0.282	0.101	Normal
8	1.100	0.333	0.767	Reverse
9	1.367	0.576	0.791	Reverse
10	0.311	-0.004	0.315	Reverse
11	0.384	0.100	0.284	Reverse
12	1.204	0.452	0.752	Reverse

$$\delta_{\text{ax}} - \delta_{\text{eq}} = -0.3$$



$$\delta_{\text{ax}} - \delta_{\text{eq}} = 0.7$$

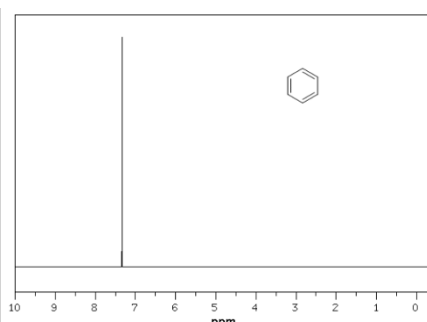
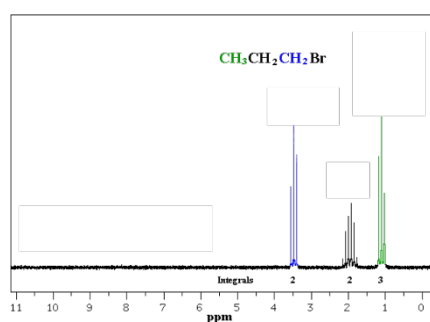


J. E. Barquera-Lozada, et al. *J. Comp. Chem.*, 2015 36, 1573.



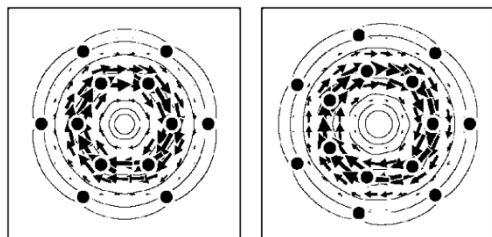
Aromaticidad y J(r)

- La aromaticidad es un concepto que explica la estabilidad inusual en algunas moléculas cíclicas.
- En las moléculas aromáticas algunos electrones están deslocalizados en todo el anillo.
- El benceno que es la molécula con la que se creó el concepto de aromaticidad tiene desplazamientos químicos "anómalos".

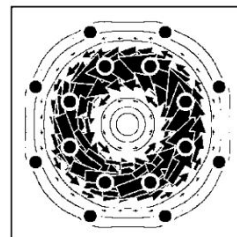


Aromaticidad y $J(r)$

Las corrientes de anillo se utilizan recurrentemente para explicar la anisotropía en el benceno



Los compuestos antiaromáticos tienen corrientes opuestas a los aromáticos

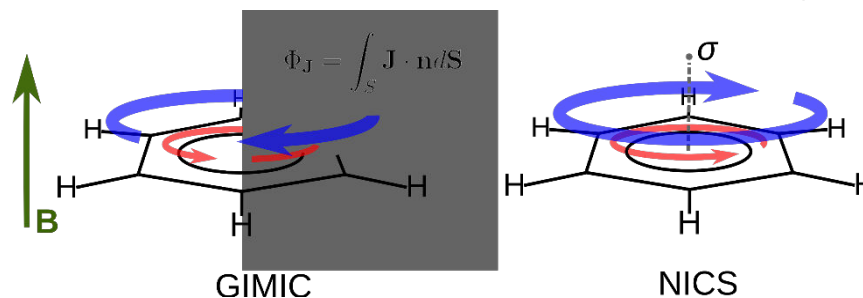


E. Steiner, et al. *Chem. Comm.*, 2001, 2220.



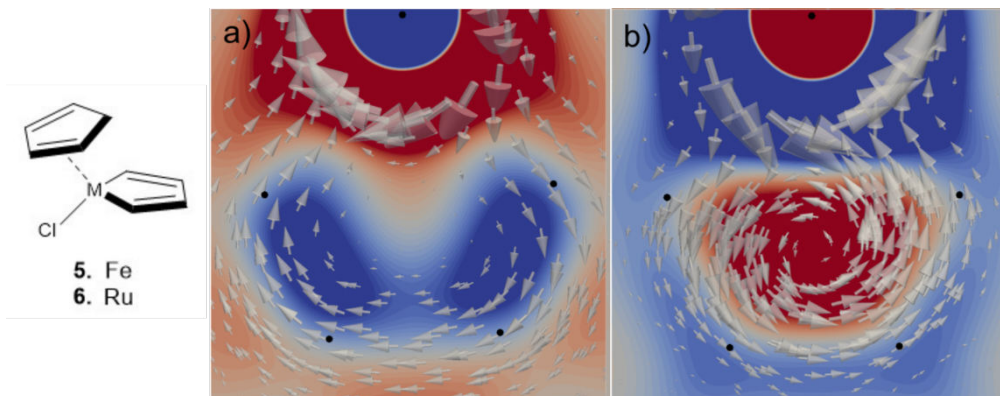
Evaluación de la aromaticidad por medio de $J(r)$

- Análisis cualitativo de las corrientes
- Cuantificación de las corrientes
 - Nuclear independent chemical shifts (NICS)
 - Gauge including magnetically induced current method (GIMIC)

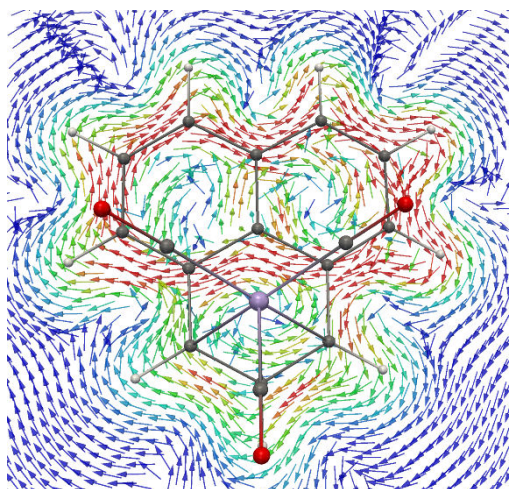


Aromaticidad en metalaciclos

- La gran mayoría de los metalaciclopentadienos son debilmente aromáticos.
- Algunos ciclos presentan corrientes contradictorias.
- Existen excepciones a la relación diatropicidad-aromaticidad



Aromaticidad en ligantes aromáticos

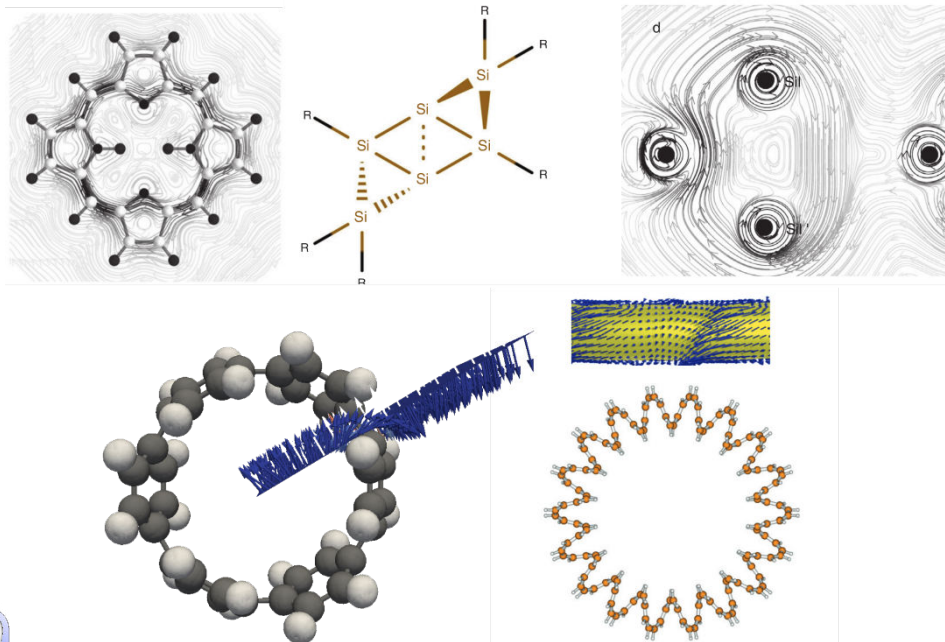


- El metal rompe con la aromaticidad del ligante.
- El número de átomos a los que se une el metal influye en el grado en el que se destruye la aromaticidad.



Otros ejemplos

La $J(\mathbf{r})$ se ha utilizado para estudiar la aromaticidad y la deslocalización electrónica en sistemas muy diversos

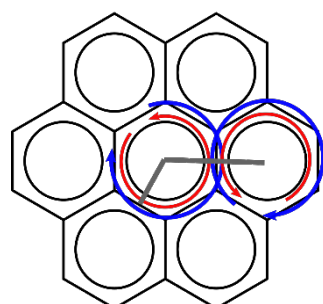


D. Sundholm, et al. *WIREs Comput Mol Sci*, 2016, 6, 639

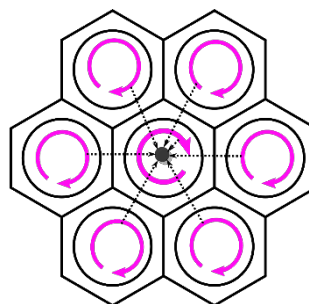


Limitaciones de $J(\mathbf{r})$

- Depende de la dirección de \mathbf{B}
- Es un campo vectorial
- Algunos métodos para cuantificarla dependen del origen
- Otros no pueden separar las contribuciones individuales
- Y otros solo pueden utilizarse con métodos empíricos



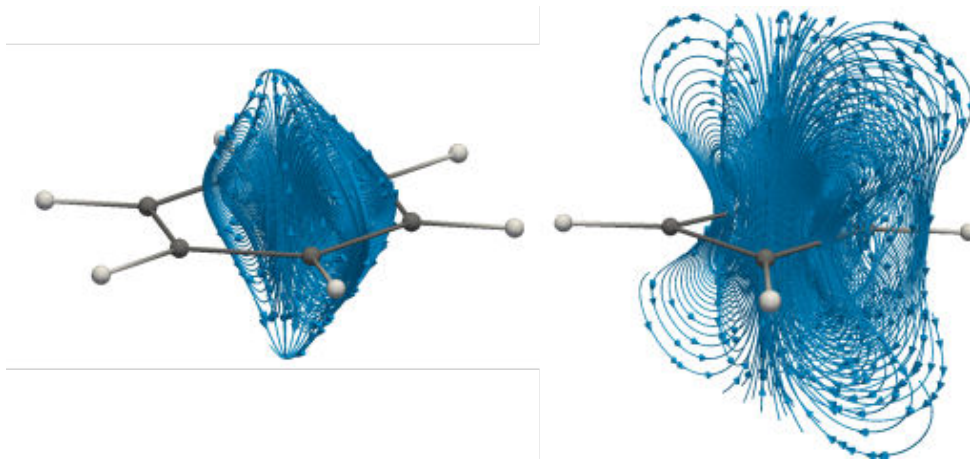
Origin dependent



All rings contribute



Vamos a simplificar sacando derivadas

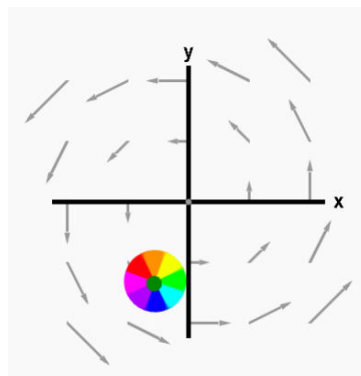


dijo nunca nadie



Vorticidad de $\mathbf{J}(\mathbf{r})$

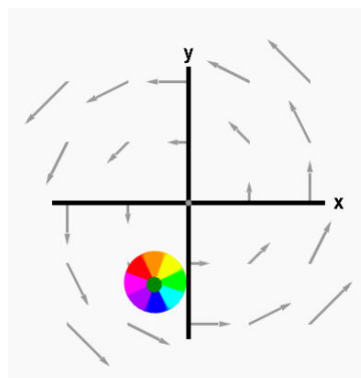
- Es el rotacional de $\mathbf{J}(\mathbf{r})$
- Mide la rotación local (anillo infinitesimal)
- Es perpendicular a $\mathbf{J}(\mathbf{r})$



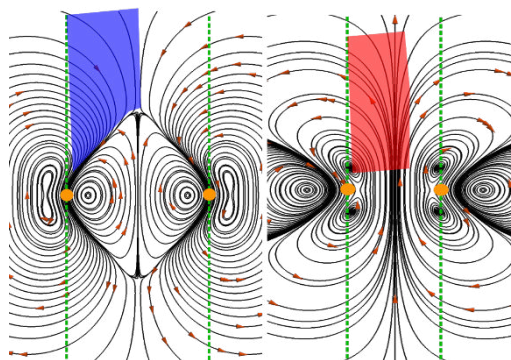
Vorticidad de $\mathbf{J}(\mathbf{r})$

- Es el rotacional de $\mathbf{J}(\mathbf{r})$
- Mide la rotación local (anillo infinitesimal)
- Es perpendicular a $\mathbf{J}(\mathbf{r})$

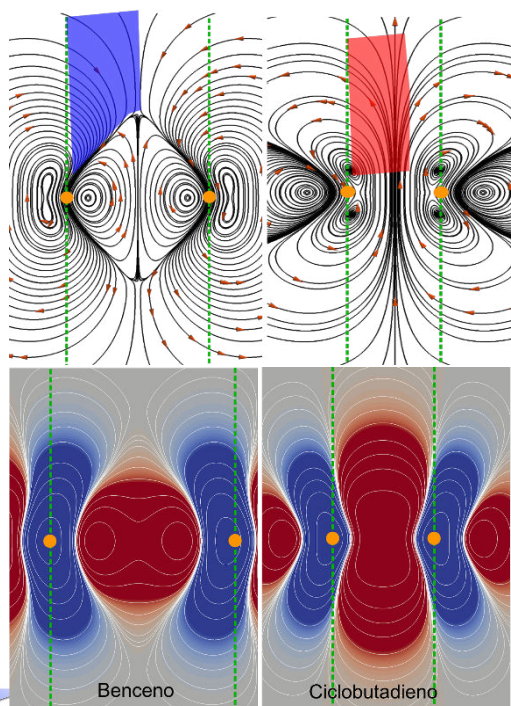
Si $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ es pseudo bidimensional entonces $\nabla \times \mathbf{J}(\mathbf{r})$ es pseudo unidimensional



¿Como comprimir $\nabla \times \mathbf{J}(\mathbf{r})$?



¿Como comprimir $\nabla \times \mathbf{J}(\mathbf{r})$?

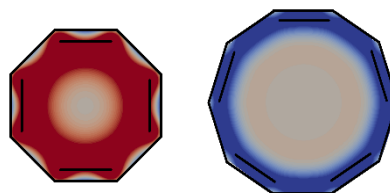


El triple producto comprime un vector en un escalar

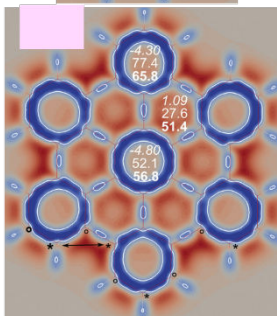
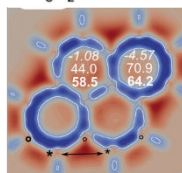
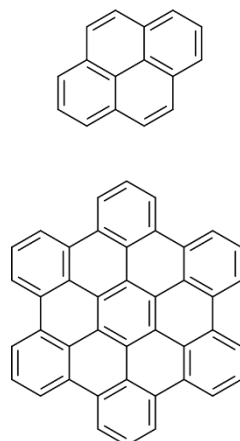
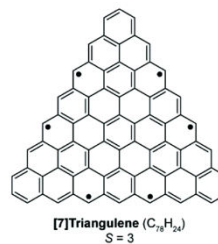
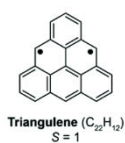
$$\text{tp}\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \mathbf{B} \cdot \nabla \times \mathbf{J}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

El signo indica si la vorticidad va a favor o en contra del campo.

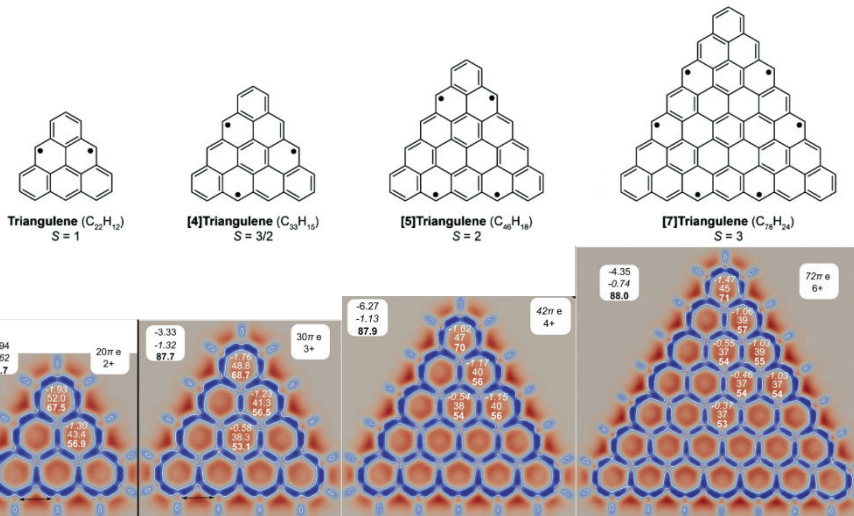
Los compuestos aromáticos tienen una mayor region diatropica.



Aromaticidad en triangulenos y regla de Clar



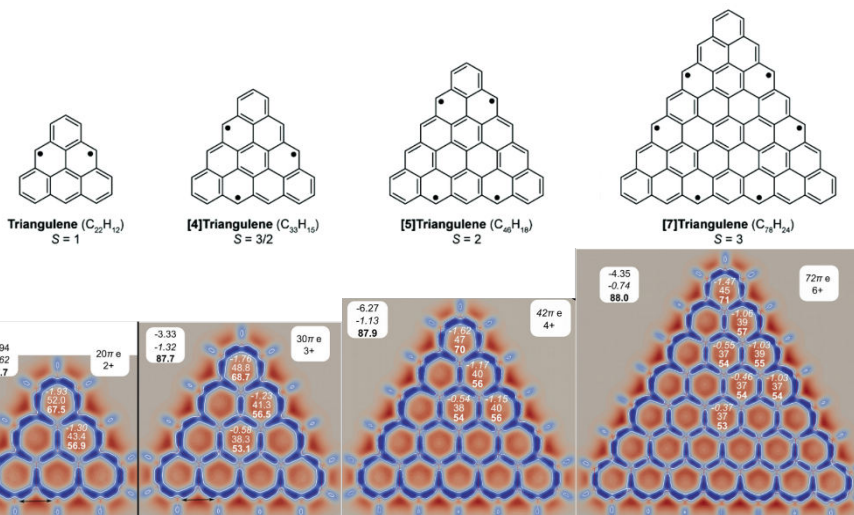
Aromaticidad en triangulenos y regla de Clar



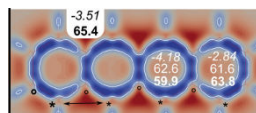
- No siguen las reglas de Clar
- Prefieren deslocalización *meta* que *para*
- Prefieren una delocalización global que local
- La deslocalización perimetral mas grande que para los acenos



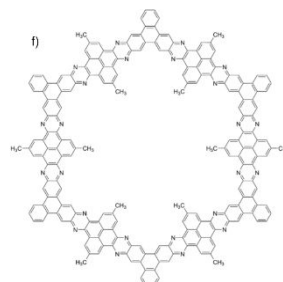
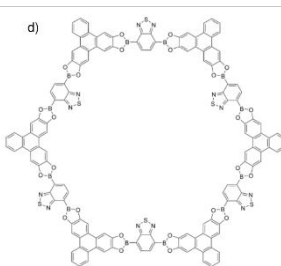
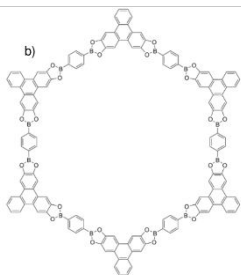
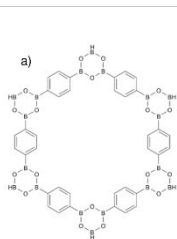
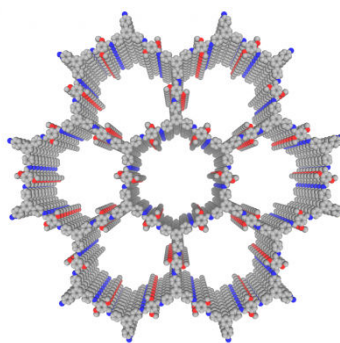
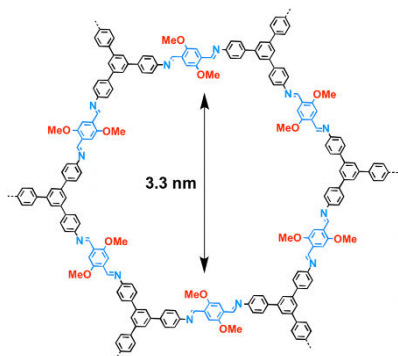
Aromaticidad en triangulenos y regla de Clar



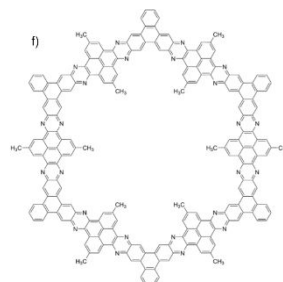
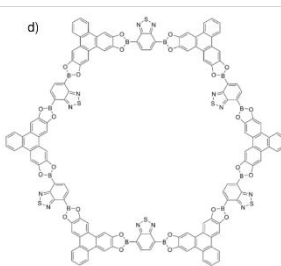
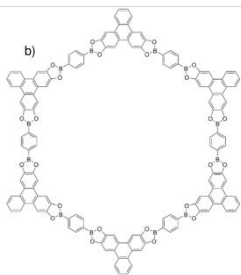
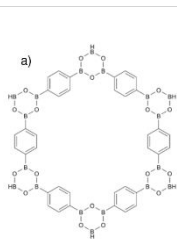
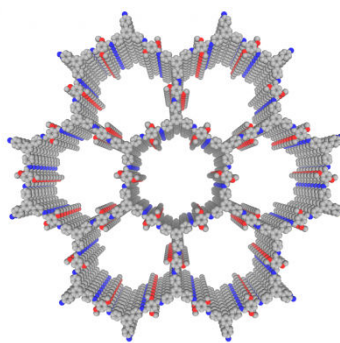
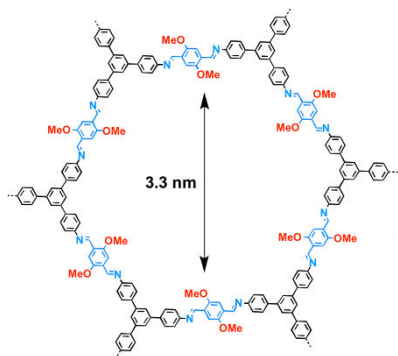
- No siguen las reglas de Clar
- Prefieren deslocalización *meta* que *para*
- Prefieren una delocalización global que local
- La deslocalización perimetral mas grande que para los acenos



Deslocalización electrónica en COFs



Deslocalización electrónica en COFs



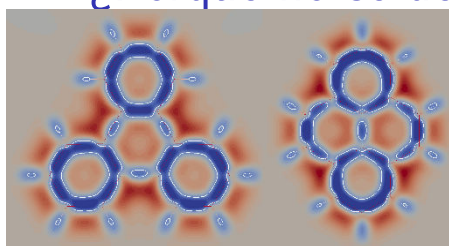
Ninguno presenta una corriente importante



¿Porqué no se deslocalizan los electrones?



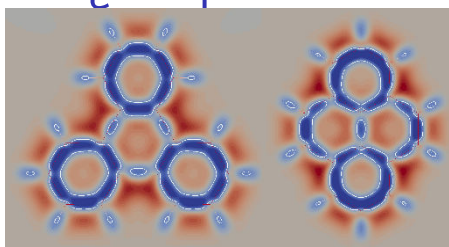
¿Porqué no se deslocalizan los electrones?



¿Prefieren la deslocalización local?

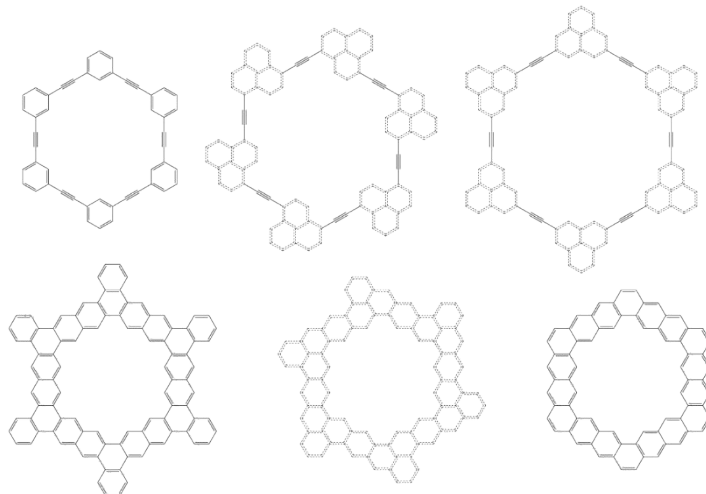


¿Porqué no se deslocalizan los electrones?

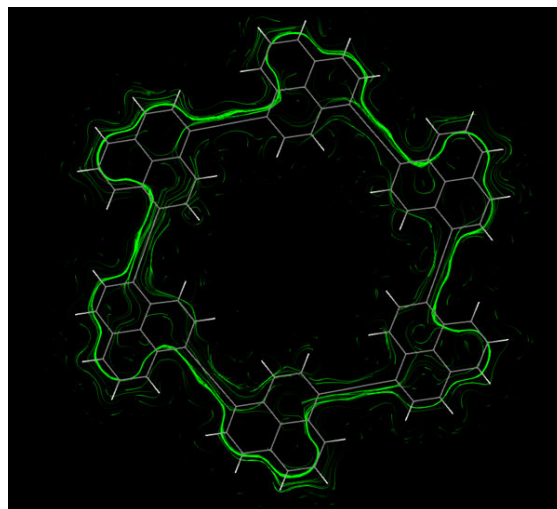
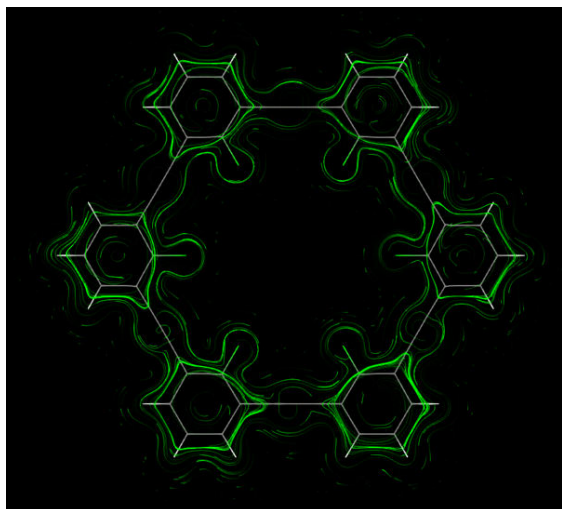


¿Prefieren la deslocalización local?

Vertices que no les guste localizarse

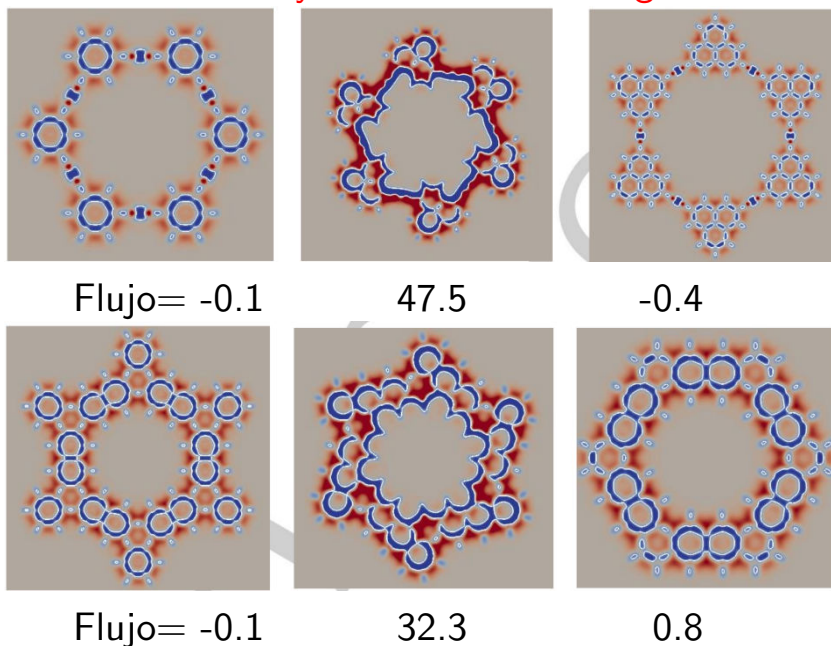


Aromaticidad global vs local



Aromaticidad global vs local

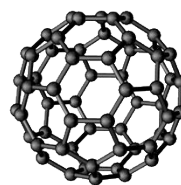
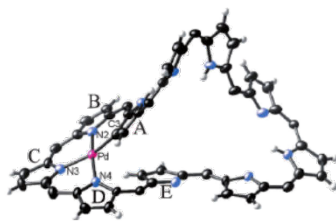
La vorticidad muestra con claridad las regiones de deslocalización local y de deslocalización global



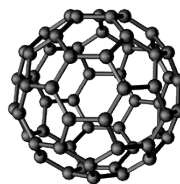
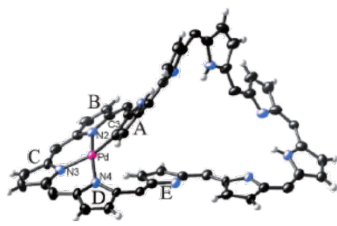
Flujo benceno = 12.0 nA/T



¿En que dirección escogemos **B** aplicado?



¿En que dirección escogemos **B** aplicado?



La vorticidad también se puede definir para el tensor de densidad de corriente ($\mathcal{J}(\mathbf{r})$) que incluye todas las direcciones

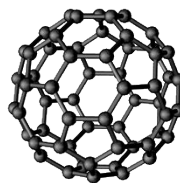
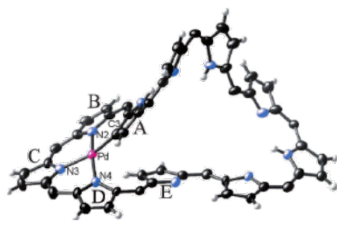
$$[\nabla \times \mathcal{J}(\mathbf{r})]_{il} = \epsilon_{ijk} \nabla_j \mathcal{J}_{kl} \quad (2)$$

El $\text{tp}\mathcal{J}(\mathbf{r})$ es uno de los elementos diagonales del tensor $\nabla \times \mathcal{J}(\mathbf{r})$, si el campo se escoge como uno de los ejes cartesianos.

Entonces, la traza de $\nabla \times \mathcal{J}(\mathbf{r})$ también contiene información de la dirección de las corrientes.



¿En que dirección escogemos **B** aplicado?



La vorticidad también se puede definir para el tensor de densidad de corriente ($\mathcal{J}(\mathbf{r})$) que incluye todas las direcciones

$$[\nabla \times \mathcal{J}(\mathbf{r})]_{il} = \epsilon_{ijk} \nabla_j \mathcal{J}_{kl} \quad (2)$$

El $\text{tp}\mathcal{J}(\mathbf{r})$ es uno de los elementos diagonales del tensor $\nabla \times \mathcal{J}(\mathbf{r})$, si el campo se escoge como uno de los ejes cartesianos.

Entonces, la traza de $\nabla \times \mathcal{J}(\mathbf{r})$ también contiene información de la dirección de las corrientes.

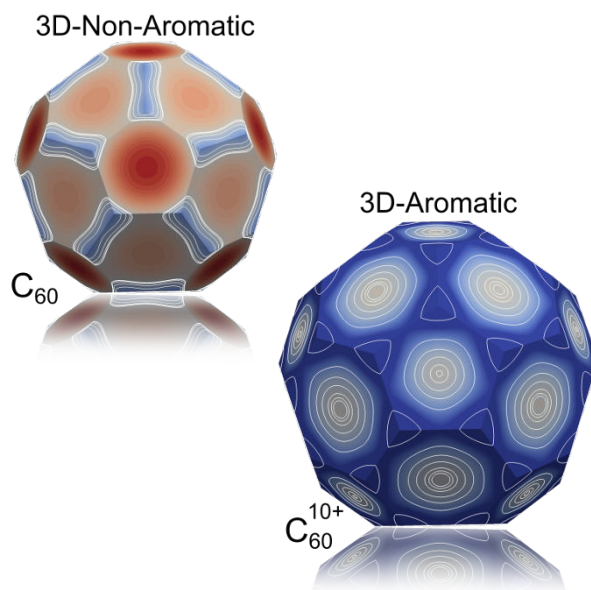
$$TVCD = 2 \left(\frac{\partial \mathcal{J}_{zy}}{\partial x} + \frac{\partial \mathcal{J}_{xz}}{\partial y} + \frac{\partial \mathcal{J}_{yx}}{\partial z} \right) \quad (3)$$

TVCD no depende de la dirección **B**



TVCD y aromaticidad en 3D

Se puede estudiar la aromaticidad en sistemas no planos

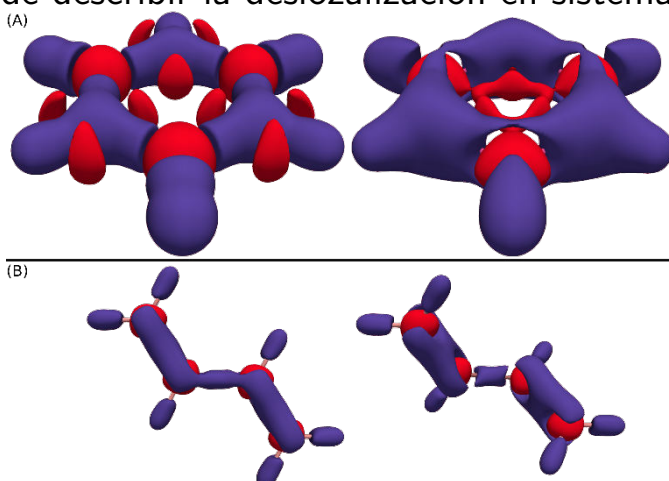


Aromaticidad 3D $(2(N + 1)^2)$



TVCD y deslocalización electrónica en sistemas abiertos y débiles

- TVCD se parece topológicamente al laplaciano de la densidad electrónica.
- pero describe mejor a sistemas deslocalizados.
- Puede describir la deslocalización en sistemas no cíclicos.



En resumen

- Los efectos cuánticos cambian significativamente la respuesta magnética clásica.
- El análisis detallado de $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ explica los desplazamientos químicos ayudado a entender las estructuras moleculares.
- $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ es útil también en el análisis de la aromaticidad y la deslocalización electrónica.
- La $\nabla \times \mathbf{J}(\mathbf{r})$ da información más detallada y puede ser comprimido en un escalar.
- Incluso se puede eliminar la dependencia con la dirección de \mathbf{B}
- $TVCD$ y $tp\mathbf{J}(\mathbf{r})$ distinguen entre la deslocalización local y la global



Gracias

- Lydia G. Ledesma Olvera
- Daniela Morales Pumarino
- Carlos V. Guzmán Espinoza
- Eduardo M. Rico Sotomayor
- E. Ricardo Casiano González
- Gustavo D. Zamudio Vidal
- Miguel A. Díaz Gutiérrez
- Salvador Jiménez Rosas
- Adrian Flores Tomas

Instituto de Química de la UNAM
CONACYT
DGTIC





Gracias por su atención

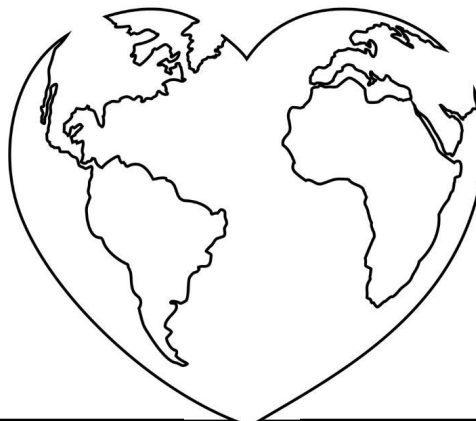


SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO A.C.
"La química nos une"



Por el **amor a la química** venimos de todos partes...

- ✓ Alemania
- ✓ Argentina
- ✓ Bélgica
- ✓ Bolivia
- ✓ Brasil
- ✓ Brunéi
- ✓ Canadá
- ✓ Chile
- ✓ Colombia
- ✓ Costa Rica
- ✓ Ecuador
- ✓ El Salvador
- ✓ España
- ✓ Estados Unidos de América
- ✓ Francia
- ✓ Guatemala
- ✓ Honduras
- ✓ India
- ✓ Italia
- ✓ Japón
- ✓ México
- ✓ Pakistán
- ✓ Panamá
- ✓ Paraguay
- ✓ Perú
- ✓ Portugal
- ✓ Puerto Rico
- ✓ Uruguay
- ✓ Venezuela
- ✓ Viet Nam



Hoy tenemos representantes de **30 países**



Mantente actualizado sobre la industria de la química
y sus ciencias afines en la región

Suscríbete al Newsletter de CAS Hispanoamérica

Para darte de alta, puedes enviarnos un correo electrónico a
acsihispanoamerica@acs-i.org

¡Hasta pronto!
www.cas.org



acsihispanoamerica@acs-i.org

11



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



Sociedad Química de México



Sociedad Química de México, A.C.
"La química nos une"

Desde sus comienzos de la Sociedad Química de México, se buscaba un emblema sencillo, no demostrar partidatismo alguno y significar al gremio, debería representar un símbolo no sólo para los químicos, sino también para ingenieros, farmacéuticos, metalurgistas, en fin, que englobe e identifique por igual a los científicos en todas sus áreas de la ciencia química.

www.sqm.org.mx

12